

3.15. Határozzuk meg a következő hullámcsomag alakját:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) \exp[i(kx - \omega(k)t)] dk,$$

$$f(k - k_0) = \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{2q^2}\right), \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

3.16. Mutassuk meg, hogy a

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp(ik_0 x), & \text{ha } |x| < \frac{l}{2}, \\ 0, & \text{ha } |x| > \frac{l}{2} \end{cases}$$

hullám nem monokromatikus! Illusztráljuk a határozatlansági relációt!

3.17. Egy antennához csatolt, ω_0 frekvenciájú rezgőkör τ idő alatt adja le energiáját. Milyen frekvenciájú vevővel foghatjuk a jeleit?

3.18. Elektronnyaláb d szélességű résen halad keresztül. Szemléltessük a határozatlansági relációt az elhajlási képben!

4. Schrödinger-egyenlet.

Egyszerű kvantummechanikai rendszerek.

Általános tételek

4.1. Rajzoljuk fel a potenciálfüggvény menetét a következő klasszikus problémákban:

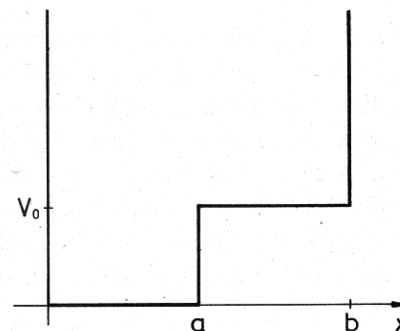
- egydimenziós harmonikus oszcillátor;
- szilárd talajon rugalmasan pattogó labda;

c) $F(x) = -\frac{x}{(x^2 + a^2)^2} F_0$ erő hatására végbemenő mozgás;

d) bolygómozgás.

Mi a klasszikus mozgás megengedett tartománya adott energia mellett?

- Írjuk fel az m tömegű részecskére vonatkozó Schrödinger-egyenletet az előző feladatbeli potenciálfüggvényekkel! Rajzoljuk be a megoldásokat különböző E energiaértékekre!
- Hogyan függ a hullámfüggvény alakja az $E - V(x)$ kinetikus energiától a klasszikusan elérhető tartományban?
- Hogyan változik a hullámfüggvény maximuma az ábrán látható potenciálvölgyben? Legyen $E > V_0$!



4.5. m tömegű részecske a szélességű, végtelen mély, derékszögű potenciálvölgyben mozog:

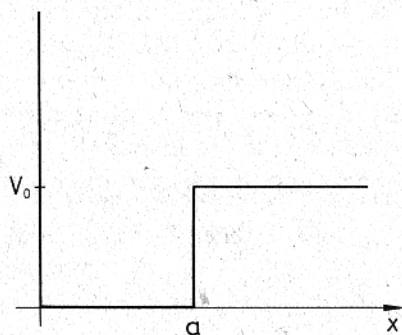
$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } 0 < x < a, \\ \infty, & \text{ha } x < 0 \text{ vagy } x > a. \end{cases}$$

Határozzuk meg az energia-sajátértékeket és -sajátfüggvényeket!

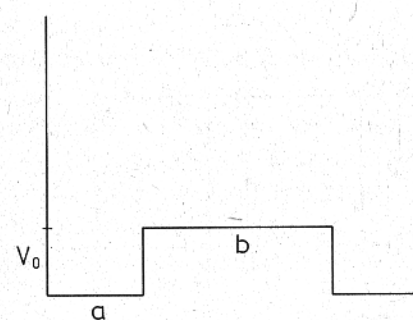
- Legyen az előző feladatban $a = 1$ cm, $m = 1$ g, a részecske sebessége pedig $v = 1$ cm s⁻¹. Mekkora az ennek megfelelő n kvantumszám és a szomszédos nívók ΔE_n távolsága?
- Mutassuk meg, hogy a végtelen mély, derékszögű potenciálvölgyben az n -edik energia-sajátállapotban $\langle x \rangle = \frac{1}{2}a$, és

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{1}{12} a^2 \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2}\right)!$$

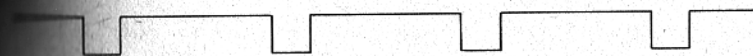
- 4.8. Végtelen mély, derékszögű potenciálvölgyben mozgó részecske hullámfüggvénye a $t=0$ pillanatban $\psi(x; t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) + \psi_2(x)]$. $\psi_n(x)$ az n -edik energia-sajátfüggvényt jelöli. Rajzoljuk fel az $|\psi(x, t)|^2$ függvényt néhány későbbi időpillanatban! Hogyan változik x és p_x várható értéke?
- 4.9. Végtelen mély, derékszögű potenciálvölgyben mozgó részecske hullámfüggvénye $\psi(x) = Ax(a-x)$. Határozzuk meg az A normálási tényezőt! Mi az energia várható értéke ebben az állapotban?
- 4.10. Végtelen mély, derékszögű potenciálvölgyben mozgó részecske energia-sajátállapotban van. Határozzuk meg a részecske által a falra kifejtett erő várható értékét! A kapott eredményt hasonlítsuk össze a megfelelő klasszikus eredménnyel!
- 4.11. Bizonyítsuk be, hogy egydimenziós, véges, derékszögű potenciálvölgyben ($V(x)=0$, ha $0 < x < a$, $V(x)=V_0$, ha $x < 0$ vagy $x > a$) mindig létezik legalább egy kötött állapot!
- Hogyan egyeztethető ez össze a határozatlansági relációval?
 - Hány kötött állapot van adott a és V_0 esetén?
- 4.12. Rajzoljuk fel az ábrán látható potenciálvölgyben mozgó részecske alapállapotának hullámfüggvényét! Rajzoljuk fel a Schrödinger-egyenlet $\psi(0)=0$ határfeltételt kielégítő megoldásait $E < E_0$ és $E > E_0$ esetén, ahol E_0 az alapállapot energiája!



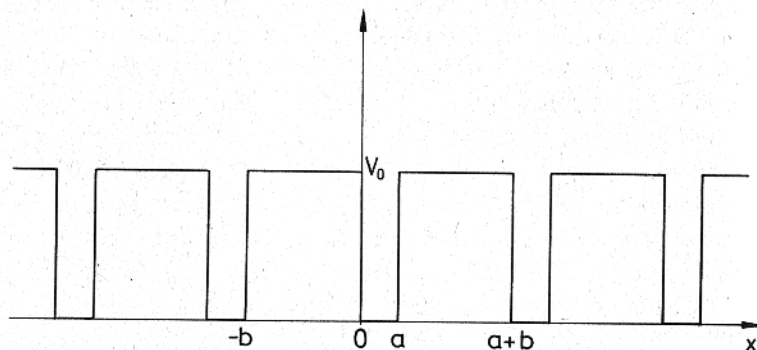
- 4.13. Mutassuk meg, hogy egydimenziós Schrödinger-egyenlet esetén a kötött állapotok energiaspektruma nem degenerált!
- 4.14. Milyen lehet egy diszkrét energia-sajátállapot hullámfüggvénye, ha a potenciál páros függvény?
- 4.15. Két vonzócentrum az ábrán látható potenciálvölgyet hozza létre.



- Rajzoljuk fel az első két energia-sajátállapot hullámfüggvényét!
 - Mutassuk meg, hogy $b \rightarrow \infty$ esetén az egyik energiaérték alulról, a másik felülről tart a 4.12. feladatbeli E_0 -hoz!
 - Milyen erőt közvetít a két centrum között a bennük mozgó részecske az egyes állapotokban?
 - Határozzuk meg az energiaszinteket és a hullámfüggvényeket közelítőleg, $E \ll V_0$, $\frac{2mV_0}{\hbar^2} b^2 \ll 1$ esetén!
- 4.16. Négy vonzócentrum az ábrán látható potenciált hozza létre. Mutassuk meg, hogy ebben négy olyan energia-sajátállapot alakul ki, amelyek energiája közel van az egyes vonzócentrumok alapállapot-energiájához! Rajzoljuk le a hullámfüggvényeket!



- 4.17. Mutassuk meg, hogy az ábrán látható periodikus potenciál-
térben mozgó részecske energiaspektruma sávszerkezetű!
Vizsgáljuk a $\frac{\sqrt{2mV_0b}}{\hbar} \ll 1, a \gg b, E \ll V_0$ határesetet!



- 4.18. m tömegű részecske $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ alakú potenciálvölgyben
mozog (harmonikus oszcillátor). Mi a valószínűsége annak,
hogy alapállapotban a klasszikusan megengedett határokon
kívül tartózkodik?
- 4.19. Harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

Bevezetjük az $\hat{a} = (2m\hbar\omega)^{-1/2}(i\hat{p} + m\omega\hat{x})$ operátort. Mutassuk
meg, hogy

a) $[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a}$, és $[\hat{H}, \hat{a}^+] = \hbar\omega\hat{a}^+$;

b) $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$;

c) Hogyan hatnak az $\hat{a}$ és $\hat{a}^+$ operátorok az energia-saját-
függvényekre?

- 4.20. Határozzuk meg az energianívókat a

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{ha } x < 0, \\ \frac{1}{2}m\omega^2x^2, & \text{ha } x > 0 \end{cases} \text{ potenciálvölgyben!}$$

- 4.21. m tömegű részecske a $-\infty < x < \infty, 0 < y < a, 0 < z < b$ tarto-
mányban mozoghat, $\mathbf{F} = (-kx, 0, 0)$ erő hat rá. Határozzuk
meg a stacionárius állapotok energiaszintjeit és hullámfüggvé-
nyeit!
- 4.22. Két részecskét $F = k(x_1 - x_2)$ rugalmas erő köt egymáshoz,
egyébként szabadon mozoghatnak az x tengely mentén. Hatá-
rozzuk meg a stacionárius állapotok energiaszintjeit!
- 4.23. m tömegű részecske nehézségi erőterben vízszintes lapon telje-
sen rugalmasan pattog. Vizsgáljuk az energia-sajátértékegyen-
letet!
- 4.24. Határozzuk meg a rögzített tengely körül forgó, Θ tehetetlen-
ségi nyomatékú merev test (síktrotátor) stacionárius állapotai-
nak hullámfüggvényeit és energiaszintjeit!
- 4.25. Egy síktrotátor hullámfüggvénye a $t=0$ pillanatban $\psi(\varphi, 0) =$
 $= A \sin^2 \varphi$. Határozzuk meg az A normálási tényezőt! Ho-
gyan változik a hullámfüggvény időben?
- 4.26. Határozzuk meg a $\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2\Theta}$ Hamilton-operátorral leírt rend-
szer (Θ tehetetlenségi nyomatékú térbeli rotátor) energia-
spektrumát és az energia-sajátfüggvényeket! Az eredményt
hasonlítsuk össze a 4.24. feladat eredményével!
- 4.27. Határozzuk meg merev falú gömbbe zárt részecske energia-sa-
jáfüggvényeit! Szorítkozzunk a 0 impulzusmomentumú álla-
potok vizsgálatára!
- 4.28. Mekkora nyomást gyakorol a merev falú gömbbe zárt részecs-
ke a gömb falára alapállapotban?
- 4.29. Részecske a

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{ha } r < a \\ 0, & \text{ha } r > a \end{cases}$$

gömbszimmetrikus potenciáltérben mozog. Határozzuk meg az energiaspektrumot, ha az impulzusmomentum 0! Mi a kötött állapot létezésének feltétele?

4.30. Határozzuk meg a háromdimenziós harmonikus oszcillátor energia-sajátfüggvényeit! Vizsgáljuk az energiaspektrum degeneráltságát L^2 és L_z szerint!

4.31. A hidrogénatom energia-sajátfüggvényeit keressük $ae^{-\alpha r}$, $bxe^{-\beta r}$, $bye^{-\beta r}$, $bze^{-\beta r}$ alakban! Mekkora a hozzájuk tartozó energia? Megoldás lesz-e a $c(x \pm iy)e^{-\beta r}$ hullámfüggvény is? Hogyan hatnak az $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ operátorok ezekre a függvényekre?

4.32. Mutassuk meg, hogy a hidrogénatom $1s$, $2p$, $3d$ állapotában a szögek szerint átlagolt $r^2\psi^2(r)$ valószínűsűrsűrűség maximuma az $r=a$, $r=4a$, $r=9a$ helyeken van $\left(a = \frac{\hbar^2}{me^2}\right)$! Milyen kapcsolatban van ez a Bohr-modell eredményeivel?

4.33. Határozzuk meg az elektrosztatikus potenciált a hidrogénatom $1s$ állapotában!

4.34. Számítsuk ki r^s várható értékét a hidrogénatom nlm kvantum-számokkal jellemzett állapotában! Legyen

$$s = 2, 1, -1, -2, -3.$$

4.35. Határozzuk meg az elektron pályamozgásából származó mágneses tér erősségét a hidrogénatom középpontjában, $2p$ állapotban!

4.36. Hogyan változik a stacionárius állapotot leíró hullámfüggvény, ha a potenciális energiához egy állandót adunk?

4.37. A Schrödinger-egyenlet megoldását írjuk $\psi(t) = \hat{S}(t)\psi(0)$ alakba, ahol $\hat{S}(t)$ valamilyen operátor! Mutassuk meg, hogy $\hat{S}(t)$ kielégíti az $i\hbar \frac{d\hat{S}}{dt} = \hat{H}\hat{S}$ egyenletet, és azt, hogy $\hat{S}$ unitér operátor! ($\hat{H}$ a rendszer Hamilton-operátora.) Mutassuk meg, hogy ha $\hat{H}$ nem függ az időtől, akkor $\hat{S}(t) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)$!

4.38. Mi a p_0 mennyiség fizikai jelentése a $\psi(x) = \varphi(x) \exp \frac{i}{\hbar} p_0 x$ hullámfüggvényben, ahol $\varphi(x)$ valós függvény?

4.39. Mutassuk meg, hogy az impulzus várható értéke stacionárius állapotban zérus, ha az energia sajátértékek diszkréttek!

4.40. m tömegű részecske potenciáltérben mozog. ψ_n az energia-sajátállapotok teljes rendszere, ψ_0 valamelyik kötött állapot, $x_{n0} = (\psi_n, \hat{x}\psi_0)$. Bizonyítsuk be, hogy

$$\sum_n \frac{2m |x_{n0}|^2}{\hbar^2} (E_n - E_0) = 1!$$

4.41. Felhasználva az $[\hat{L}^2, \hat{x}_i] = 2\hbar^2 \hat{x}_i$ csererelációt, mutassuk meg, hogy impulzusmomentum-sajátállapotban a dipólmomentum várható értéke zérus! Létezik-e olyan energia-sajátállapot, amelyben a dipólmomentum várható értéke nem zérus

- Coulomb-potenciál;
- térbeli harmonikus oszcillátor potenciál;
- tetszőleges gömbszimmetrikus potenciál esetén?

4.42. Becsüljük meg az alapállapot energiáját a határozatlansági összefüggés alapján

- harmonikus oszcillátor esetében,
- hidrogénatomban,
- végtesen mély, derékszögű potenciálvölgyben mozgó részecske esetén!

4.43. Határozzuk meg valamilyen $\hat{A}$ operátorral leírt fizikai mennyiség várható értékének időbeli változását a Schrödinger-egyenlet alapján! Mutassuk meg, hogy

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle!$$

4.44. Írjuk fel $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle$ és $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$ időderiváltját az előző feladat alapján, ha a Hamilton-operátor

$$a) \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}),$$

$$b) \hat{H} = \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)\right)^2}{2m} + e\hat{\phi}(\mathbf{r}, t)!$$

Az eredményt hasonlítsuk össze a megfelelő klasszikus összefüggésekkel!

4.45. Az E , $\mathbf{p}$, $\mathbf{L}$, L^2 mennyiségek közül melyek maradnak meg az alábbi mozgások során:

- szabad mozgás,
- $V(z) = az$ potenciál (egyenletesen töltött, végtelen kiterjedésű sík tere);
- $V(r)$ gömbszimmetrikus potenciál;
- $V(\varrho)$ hengersizmetrikus potenciál;
- $V(z, t) = a(t) \cdot z$, időben változó, homogén tér?

4.46. Elektron egy homogén, z tengely irányú mágneses térben mozog ($\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$). Mutassuk meg, hogy az $x_0 = x + \frac{cp_y}{eB}$,

$y_0 = -\frac{cp_x}{eB}$ mennyiségek (a klasszikus körmozgás középpontjának koordinátái) mozgásállandók! Mérhetők-e egyszerre pontosan?

4.47. Mutassuk meg, hogy ha a Schrödinger-kép, Heisenberg-kép és kölcsönhatási (Dirac-) kép valamelyikében fennáll az $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ felcserélési összefüggés, akkor fennáll a másik kettőben is!

4.48. Fejezzük ki a Heisenberg-képbeli $\hat{x}_H$ koordinátaoperátort a Schrödinger-kép $\hat{x}$ és $\hat{p}$ operátorával szabad tömegpont esetén!

4.49. Határozzuk meg a lineáris harmonikus oszcillátor Heisenberg-képbeli koordináta- és impulzusoperátorát!

4.50. Számítsuk ki a $[\hat{p}_H(t_1), \hat{x}_H(t_2)]$, $[\hat{p}_H(t_1), \hat{p}_H(t_2)]$, $[\hat{x}_H(t_1), \hat{x}_H(t_2)]$ kommutátorokat a harmonikus oszcillátor esetében!

4.51. Szabadon mozgó részecske hullámfüggvénye a $t=0$ időpontban $\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2}\right)$. Hogyan változik időben ez a hullámcsomag?

4.52. Vizsgáljuk a lineáris harmonikus oszcillátor energia-sajátérték egyenletét impulzusreprezentációban!

4.53. Írjuk fel a lineáris harmonikus oszcillátor koordinátaoperátort energiareprezentációban!

4.54. Írjuk fel a lineáris harmonikus oszcillátor impulzusoperátort energiareprezentációban!

4.55. Határozzuk meg a koordináta- és az impulzusmátrixot energiareprezentációban, végtelen mély derékszögű potenciálvölgyben mozgó részecskére!

4.56. Egy μ tömegű részecske $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \hat{V}(\mathbf{r})$ Hamilton-operátorának spektruma az E_n diszkrét szintekből épül fel. Mutassuk meg, hogy fennáll a

$$\sum_n (E_n - E_m) |x_{nm}|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}$$

Thomas-Reiche-Kuhn-féle összecsabály, ahol x az $\mathbf{r}$ helyzetvektor egyik derékszögű komponense! (L. a 4.40. feladatot!)

5. Impulzusmomentum

5.1. Keressünk olyan függvényt, amely

- $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ közös sajátfüggvénye;
- $\hat{L}^2$ -nek sajátfüggvénye, de $\hat{L}_z$ -nek nem;
- $\hat{L}^2$ -nek és $\hat{L}_x$ -nek sajátfüggvénye, de $\hat{L}_z$ -nek nem!

5.2. Határozzuk meg $\hat{L}_x$ zérus sajátértékhez tartozó sajátfüggvényét, ha $l=1$!

5.3. Hogyan hatnak az $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ operátorok az $1, x, y, z, x^2, y^2, z^2, xy, yz, zx$ függvényekre? Mutassuk meg, hogy gömbszimmetrikus függvénnel való szorzás nem változtat az eredményeken! Hogyan hat az $\hat{L}^2$ operátor az egyes függvényekre?

- 5.4. Részecskét leíró hullámfüggvény $2(x^2 - y^2)f(x^2 + y^2 + z^2)$ alakú. Milyen valószínűséggel vesz fel L_z meghatározott értékeket?
- 5.5. Mutassuk meg, hogy ha $\hat{L}_z\psi = m\psi$, akkor L_x és L_y várható értéke zérus!
- 5.6. Mutassuk meg, hogy ha egy ψ állapotban $\hat{L}_z\psi = m\hbar\psi$, akkor az impulzusmomentum valamilyen z' tengelyre eső vetületének várható értéke $m \cos \vartheta$, ahol ϑ a z és z' tengelyek által bezárt szög!
- 5.7. Mi az L_x^2 várható értéke abban a ψ állapotban, amelyre $\hat{L}_z\psi = m\hbar\psi$, $\hat{L}^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi$?
- 5.8. Keressük meg az $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$ stb. felcserélési relációk összes olyan 2×2 -es mátrixábrázolását, amelyben $\hat{S}_z$ diagonális!
- 5.9. A $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ impulzusmomentum-operátorok helyett vezessük be a $\hat{j}_- = \frac{1}{\hbar}[\hat{J}_x - i\hat{J}_y]$, $\hat{j}_+ = \frac{1}{\hbar}[\hat{J}_x + i\hat{J}_y]$, $\hat{j}_3 = \frac{1}{\hbar}\hat{J}_z$, $\hat{j}^2 = \frac{1}{\hbar^2}\hat{J}^2$ operátorokat! Határozzuk meg a felcserélési relációkat!
- 5.10. $|j, m\rangle$ jelentse azt az állapotot, amelyre $\hat{j}^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle$, $\hat{j}_3|j, m\rangle = m|j, m\rangle$! Hogyan hatnak erre az állapotra az előző feladatban definiált $\hat{j}_+$, $\hat{j}_-$ operátorok?
- 5.11. Bizonyítsuk be a következő egyenlőséget:

$$\langle lm|\hat{A}|lm'\rangle = \frac{\langle lm|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{A}}|lm\rangle}{l(l+1)\hbar^2} \langle lm|\hat{\mathbf{L}}|lm'\rangle,$$

ahol $\hat{\mathbf{A}}$ tetszőleges vektoroperátor, amely kielégíti az $[\hat{L}_i, \hat{A}_k] = i\epsilon_{ikl}\hat{A}_l$ felcserélési törvényt. Mutassuk meg, hogy az $\langle lm|\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{A}}|lm\rangle$ ún. redukált mátrixelem független m -től (Wigner-Eckart-tétel)!

- 5.12. Határozzuk meg $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}$ sajátértékeit és sajátvektorait! $\mathbf{e}$ a ϑ, φ polárszögekkel meghatározott egységvektor, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ a Pauli-mátrixokat jelöli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- 5.13. Az $\frac{1}{2}$ spinű részecske legáltalánosabb spinhullámfüggvénye

$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \delta \\ e^{i\beta} \sin \delta \end{pmatrix}$. Milyen eredményt kapunk, ha ebben az állapotban mérjük a spin tetszőleges, ϑ, φ polárszögekkel jellemzett tengelyre vonatkozó vetületét?

- 5.14. Mutassuk meg, hogy $\frac{1}{2}$ spinű részecske tetszőleges spinállapothoz megválaszthatjuk úgy a z tengely irányát, hogy S_z mérési eredménye $\frac{\hbar}{2}$ legyen!

- 5.15. Elektron spinjének z komponense $\frac{\hbar}{2}$. Mi a valószínűsége annak, hogy valamilyen z' tengelyre eső vetülete $\frac{\hbar}{2}$, ill. $-\frac{\hbar}{2}$ legyen?

- 5.16. $\frac{1}{2}$ spinű részecske centrális erőterben mozog. Keressük meg azokat a hullámfüggvényeket, amelyek közös sajátfüggvényei az egymással felcserélhető $\hat{L}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$ operátoroknak ($\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$)!

- 5.17. A $\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}, \hat{J}^2, \hat{L}^2$ ($\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$) operátorok közül legfeljebb hánynak lehet közös sajátfüggvényrendszere? Melyek lehetnek ezek az operátorok?

- 5.18. Az 1 spinű részecske spinoperátorai a következő alakban írhatók:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -i \\ 1 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 1 \\ i & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Mutassuk meg, hogy ezek kielégítik az impulzusmomentum csererelációkat! Határozzuk meg $\hat{S}_z$ sajátértékeit és sajátvektorait!

5.19. Határozzuk meg S_e sajátértékeit és sajátvektorait, ha e a ϑ, φ polárszögekkel meghatározott egységvektor, és $S = (S_x, S_y, S_z)$ az előző feladatban felírt mátrixok!

5.20. A Stern–Gerlach-kísérlet során a j teljes impulzusmomentumú atomnyaláb elhajlási szöge attól függ, mekkora az impulzusmomentum vetülete a mágneses tér irányára. Ha a részecsenyaláb impulzusmomentumának valamely, a mágneses tér irányától különböző tengelyre való m vetülete jól meghatározott, akkor az eredeti nyaláb $2j+1$ résznyalábra bomlik fel. Határozzuk meg a résznyalábok relatív intenzitását, ha $j=1$, és $m=1, 0, -1$!

5.21. a) Hogyan írható fel az 1 spinű részecske legáltalánosabb spinhullámfüggvénye?

b) Vannak-e állapotok, amelyekben a spin meghatározott irányba mutat?

c) Tetszőleges állapotban meghatározott irányba mutat-e a spin?

5.22. $\hat{S}_1$ és $\hat{S}_2$ két, $\frac{1}{2}$ spinű részecske spinoperátora, $S = S_1 + S_2$ a teljes spin. Határozzuk meg az $\hat{S}^2$ és $\hat{S}_z$ operátorok közös sajátfüggvényeit! Mutassuk meg, hogy ezek $\hat{S}_1\hat{S}_2$ -nek is sajátfüggvényei!

5.23. Két, $\frac{1}{2}$ spinű részecske ún. mágneses dipól–dipól kölcsönhatását a

$$V = A \cdot \frac{(\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)r^2 - 3(\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{r})(\hat{\sigma}_2 \cdot \hat{r})}{r^5}$$

potenciál írja le. Határozzuk meg a kölcsönhatási energiát, ha a két részecske d távolsága rögzített!

5.24. A hidrogénatomban az elektron és proton spinje közötti kölcsönhatást egy effektív $A\sigma_1 \cdot \sigma_2$ potenciállal vehetjük figyelem-

be. Hogyan hasítja fel ez a kölcsönhatás az 1s állapot energiáját?

5.25. Két, egymástól d távolságra levő, $\frac{1}{2}$ spinű részecske kölcsönhatása mágneses dipól–dipól jellegű. $t=0$ -kor az egyik spin meg egyező, a másik ellentétes irányú a részecskéket összekötő egyenessel. Mennyi idő múlva fordulnak meg a spinek?

5.26. Írjuk fel az elektron spinhullámfüggvényére vonatkozó mozgásegyenletet időben állandó, homogén mágneses térben! Legyen $t=0$ -kor

$$\begin{pmatrix} S_1(0) \\ S_2(0) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Hogyan változik időben $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$, $\langle S_z \rangle$?

5.27. Mutassuk meg, hogy időben változó homogén mágneses térben mozgó, $\frac{1}{2}$ spinű részecske hullámfüggvénye felírható mint

a térbeli hullámfüggvény és a spinhullámfüggvény szorzata!

5.28. Időben változó, z irányú homogén mágneses térben mozgó elektron spinhullámfüggvénye $t=0$ -kor

$$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos \delta \\ e^{i\alpha} \sin \delta \end{pmatrix}.$$

Határozzuk meg azt az irányt, amely mentén a spin jól meghatározott érték a t időpillanatban!

5.29. Szabad elektron z irányú állandó H_0 és az xy síkban forgó H' mágneses térben van, $H'_x = H' \cos \omega t$, $H'_y = H' \sin \omega t$, $H'_z = 0$. Kezdetben az elektron spinje z irányú. Milyen valószínűséggel találjuk t idő múlva a spint $-z$ irányban?

6. Közelítő módszerek

- 6.1. Kétállapotú kvantummechanikai rendszer energiaértékei E_1, E_2 . Erre $V = \begin{pmatrix} 0 & V \\ V^* & 0 \end{pmatrix}$ időfüggetlen perturbáció hat. Hogyan fejlődik a rendszer időben, ha $t=0$ -kor az 1 állapotban volt? Hasonlítsuk össze az egzakt megoldás és az elsőrendű perturbációs számítás eredményét!
- 6.2. Számítsuk ki a hidrogénatom első két energiaszintjének perturbációját első közelítésben, külső homogén elektromos térben!
- 6.3. Határozzuk meg a hidrogénatom $n=2$ energiaszintjéhez tartozó olyan állapotokat, amelyekben az elektromos dipólmomentum nem zérus!
- 6.4. Legyen $\Delta E = -\frac{1}{2}\alpha\mathcal{E}^2$ a hidrogénatom alapállapotának energiaeltolódása $\mathcal{E}$ külső homogén elektromos erőterben, a perturbációs számítás második közelítésében! Mutassuk meg, hogy $4a_H^3 < \alpha < \frac{16}{3}a_H^3$, ahol a_H a Bohr-sugár!
- 6.5. Gömbszimmetrikus erőterben mozgó, zérus spinű részecske energiaszintjei E_n . Határozzuk meg az energiaszintek és a hullámfüggvények perturbációját külső homogén mágneses térben!
- 6.6. d elektromos dipólmomentumú, Θ tehetetlenségi nyomatékú síkbeli rotátor síkjában homogén $\mathcal{E}$ elektromos teret kapcsolunk be. Határozzuk meg energiaszintek perturbációját!
- 6.7. Határozzuk meg a $H' = \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ spin-pálya kölcsönhatás energiakorrekcióit a hidrogénatom spektrumához!
- 6.8. Határozzuk meg a hidrogénatom energiaspektrumához járuló korrekciókat, ha figyelembe vesszük a tömeg sebességfüggését (a $\frac{v^2}{c^2}$ rendű tagokig)!

- 6.9. Határozzuk meg a homogén, időben állandó mágneses térbe helyezett hidrogénatom energiaspektrumát, feltéve, hogy a mágneses térrel való kölcsönhatás energiája sokkal kisebb a spin-pálya kölcsönhatás energiájánál!
- 6.10. Oldjuk meg az előző feladatot abban az esetben, ha a mágneses térrel való kölcsönhatás energiája sokkal nagyobb a spin-pálya kölcsönhatás energiájánál, de sokkal kisebb, mint az egyes multiplettek energiakülönbsége!
- 6.11. Oldjuk meg az előző feladatot abban az esetben, ha a mágneses kölcsönhatás energiája összemérhető a spin-pálya kölcsönhatás energiájával!
- 6.12. Két azonos, $\frac{1}{2}$ spinű részecske 10^{-8} cm oldalú kockába van zárva. Ha távolságuk kisebb, mint 10^{-10} cm, akkor 10^{-3} eV nagyságú, taszító potenciál hat közöttük. Határozzuk meg az alapállapot energiáját és hullámfüggvényét!
- 6.13. Határozzuk meg a $Z+1$ rendszámú mag terében mozgó elektron energiaszintjeit mint a Z -hez tartozó energiaszintek perturbáltjait! Mikor használható ez a közelítés?
- 6.14. Milyen perturbációt okoz az atommag véges kiterjedése a hidrogénatom energiaszintjeire? Az atommagot tekintsük homogén töltéseloszlású gömbnek!
- 6.15. A 6.1. feladatbeli rendszert milyen valószínűséggel találjuk t időben az 1 és 2 állapotokban? Hasonlítsuk össze az időtől függő perturbációs számítás eredményét a korábbi eredményekkel!
- 6.16. Az e elektromos töltésű lineáris harmonikus oszcillátor $\delta(t) = A \frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right)$ gyenge elektromos térben mozog. A $t = -\infty$ időpontban az oszcillátor alapállapotban volt. Mi a valószínűsége annak, hogy a $t = \infty$ időpontban az első gerjesztett állapotban találjuk?
- 6.17. Az e elektromos töltésű lineáris harmonikus oszcillátor mozgásirányával párhuzamosan, időben állandó $\mathcal{E}$ elektromos teret létesítünk. A tér bekapcsolásakor az oszcillátor alapállapotban volt.

potban volt. Milyen valószínűséggel találjuk meg egy későbbi időpontban az első gerjesztett állapotban?

- 6.18.** Alapállapotú hidrogénatomot $t=0$ időpontban egy kondenzátor lemezei közé helyezünk, ahol az elektromos térerősség $\mathcal{E}_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$ szerint változik. Milyen valószínűséggel gerjesztdnek a magasabb energiájú állapotok?
- 6.19.** m tömegű részecske $V_0 e^{-r/a}$ potenciálvölgyben mozog. Határozzuk meg az alapállapot energiáját variációs módszerrel! Próbafüggvény: $\varphi_\lambda = N e^{-\lambda r}$. (Ez a potenciál jó közelítéssel leírja a proton-neutron kölcsönhatást, $a = 2,18 \cdot 10^{-13}$ cm, $V_0 = 32,7$ MeV a kísérleti értékekből.)
- 6.20.** Határozzuk meg a

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{ha } x < 0 \\ cx, & \text{ha } x > 0 \end{cases}$$

potenciálvölgyben mozgó részecske alapállapotának energiáját variációs módszerrel! A próbafüggvény legyen $x e^{-ax}$.

- 6.21.** Tételezzük fel, hogy a lineáris harmonikus oszcillátor alapállapotának hullámfüggvénye $N e^{-cx^2}$. Variációs módszerrel határozzuk meg c értékét és az alapállapot energiáját!
- 6.22.** Keressük meg a lineáris harmonikus oszcillátor első gerjesztett állapotának energiáját és hullámfüggvényét a variációs módszer segítségével! Használjuk fel, hogy az alapállapot hullámfüggvényét ismerjük!
- 6.23.** Tételezzük fel, hogy a hidrogénatom alapállapotának hullámfüggvénye $A e^{-cr^2}$. Variációs módszerrel határozzuk meg c értékét és az alapállapot energiáját!
- 6.24.** Tételezzük fel, hogy a hidrogénatom alapállapotának hullámfüggvénye $A r e^{-br}$. Variációs módszerrel határozzuk meg b értékét és az alapállapot energiáját!
- 6.25.** Alkalmazzuk a variációs módszert az egydimenziós, végtelen mély potenciálvölgyben való mozgás problémájára! Legyen $V=0$, ha $|x| \leq 1$, $V=\infty$ egyébként! Próbafüggvényként válasszuk a $c_1(1-x^2) + c_2(1-x^4)$ kombinációt!

- 6.26.** Végezzük el a kváziklasszikus hullámfüggvények illesztését a klasszikus fordulási pontokban!
- 6.27.** Vezessük le a kváziklasszikus közelítésből a Bohr-Sommerfeld kvantumfeltételt!
- 6.28.** Bizonyítsuk be, hogy az E energiájú részecskének a $V(x)$ potenciálfalon áthatolási együtthatója kváziklasszikus közelítésben $G \approx e^{-2L}$, ahol

$$L = \frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(V(x) - E)} dx, \quad V(a) = V(b) = E.$$

7. Szórásszámítás

- 7.1.** Tetszőleges potenciálgátra élesen meghatározott p impulzussal beeső síkhullám áthaladását és visszaverődését a Schrödinger-egyenlet

$$\varphi_p(x) \rightarrow \begin{cases} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) + R(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right), & \text{ha } x \rightarrow -\infty, \\ D(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right), & \text{ha } x \rightarrow \infty \end{cases}$$

megoldása jellemzi. Egy lokalizált, mégis nagyjából p_0 impulzussal szabadon haladó részecskét a

$$\psi_0(x, t) = \int A(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t\right)\right) dp$$

hullámcsomag ír le, ha az $A(p)$ függvény csak p_0 kis környezetben különbözik zérustól. Mutassuk meg, hogy a

$$\psi(x, t) \rightarrow \int A(p) \varphi_p(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) dp.$$

szuperpozíció a balról érkező hullámcsomagnak a potenciálgáton való áthaladását írja le!

- 7.2. Tetszőleges potenciállépcsőre élesen meghatározott p impulzussal érkező síkhullám áthaladását és visszaverődését a

$$\varphi_p(x) \rightarrow \begin{cases} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) + R(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right), & \text{ha } x \rightarrow -\infty, \\ D(p') \exp\left(\frac{i}{\hbar} p'x\right), & \text{ha } x \rightarrow \infty \end{cases}$$

megoldás jellemzi, ahol $\frac{p^2}{2m} = \frac{p'^2}{2m} + V_0$, és V_0 a potenciállépcső ugrása. Mutassuk meg: az előző feladat állítása úgy módosul, hogy az áthaladás, ill. a visszaverődés valószínűsége

$$|R(p_0)|^2, \quad \text{ill.} \quad \frac{(p_0^2 - 2mV_0)^{1/2}}{p_0} |D(p_0)|^2.$$

- 7.3. Az x tengely mentén p impulzussal haladó részecske potenciálgáthoz érkezik. Bizonyítsuk be, hogy az áthaladás és a visszaverődés valószínűsége független a bejövő részecske irányától!
- 7.4. Határozzuk meg a kötött és a szórási állapotokat a $V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \beta \delta(x)$ potenciálban! Mi a kapcsolat a kötött állapotok energiája és a szórási amplitúdók között? Mutassuk meg, hogy a szórási állapotok ortogonálisak a kötött állapotokra!
- 7.5. Az x tengely mentén a pozitív irányba p impulzussal haladó részecske igen keskeny, igen magas potenciálfalba ütközik, amelynek alakját $V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \beta \delta(x)$ írja le. Határozzuk meg a visszaverődési és az áthatolási együtthatót!
- 7.6. m tömegű, E energiájú részecske a szélességű, V_0 magasságú derékszögű potenciálgátnak ütközik. Számítsuk ki az áthatolási és a visszaverődési együtthatót $E > V_0$ és $0 < E < V_0$ esetén! Melyek azok az energiaértékek, amelyeknél nincs visszaverődés? Mennyi egy 5 eV energiájú elektron, ill. proton áthaladási valószínűsége, ha $V_0 = 10$ eV, $a = 10^{-8}$ cm?

- 7.7. A vezetési elektronokat egy belső potenciálnak nevezett kö-zéptér-potenciál tartja a fémek belsejében. Egydimenziós modellben

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & \text{ha } x < 0, \\ 0, & \text{ha } x > 0. \end{cases}$$

Határozzuk meg az elektronnak a fém határfelületéről való visszaverődési, ill. a felületen való áthatolási valószínűségét, ha $E > 0$, ill. ha $-V_0 < E < 0$! Milyen valószínűséggel találjuk utóbbi esetben az elektronokat a fémen kívül? (Szám példa: $V_0 = 10$ eV, $E = 0,1$ eV, ill. $E = -1$ eV.)

- 7.8. Számítsuk ki az elektronoknak a fém felületén való áthatolási valószínűségét kváziklasszikus közelítésben, ha $-V_0 < E < 0$, és $x > 0$ esetén a potenciál $V(x) = -\mathcal{E}x$. ($\mathcal{E}$ = külső elektromos tér.)
- 7.9. Az alagúteffektussal magyarázható az a tény, hogy a néhány MeV energiájú α -részecskék elhagyhatják a radioaktív magok több 10 MeV mélységű potenciálvölgyeit. Legyen $V(r) = -V_0$, ha $r < R_0$, és $V(r) = \frac{e_1 e_2}{r}$, ha $r > R_0$! Határozzuk meg az E energiájú α -részecskék áthatolási együtthatóját!
- 7.10. Bizonyítsuk be, hogy lassú részecskék szórási hatáskeresztmetszete független az energiától, és hogy a szórás izotrop!
- 7.11. Határozzuk meg lassú részecskék V_0 mélységű, a sugarú potenciálgödrön való szórásának hatáskeresztmetszetét! Mi a helyzet ha a potenciálvölgyben $E \cong 0$ kötött állapot létezik?
- 7.12. Határozzuk meg a lassú részecskék V_0 magasságú, a sugarú potenciálhegyen való szóródásának hatáskeresztmetszetét!
- 7.13. Részecskenyaláb állandó v sebességgel érkezik egy tartományba, ahol egy része elnyelődik. Az abszorpció leírható úgy, hogy $V_r - iV_i$ állandó komplex potenciált vezetünk be a hullámegyenletbe. Mutassuk meg, hogy az egy atomra jutó abszorpciós hatáskeresztmetszet, $\sigma_{ab} = \frac{2V_i}{\hbar N v}$, ahol N a térfogat-egységben levő abszorbeáló atomok száma!

- 7.14. Gyors neutronok nehéz atommagokon szóródnak, a neutronok hullámhossza kicsi a mag sugarához képest ($ka \gg 1$). Feltételezzük, hogy a mag elnyel minden $l < ka \equiv l_0$ impulzusmomentumú neutron, az $l > l_0$ impulzusmomentumúakkal pedig egyáltalán nem hat kölcsön. Mit jelent ez a szórásamplitúdóban szereplő S_l és δ_l függvényekre nézve? Határozzuk meg a rugalmas hatáskeresztmetszetet, a reakció hatáskeresztmetszetet és a teljes hatáskeresztmetszetet!
- 7.15. Határozzuk meg a Born-közelítés alkalmazhatóságának feltételét a $V(r) = V_0 e^{-r/r_0}$ potenciálra!
- 7.16. Határozzuk meg a differenciális és a teljes hatáskeresztmetszetet Born-közelítésben a $V(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-r/a}$ potenciálon való szóródásnál!
- 7.17. Határozzuk meg a differenciális és a teljes hatáskeresztmetszetet Born-közelítésben az
- $V(r) = V_0 e^{-r^2/2a^2}$,
 - $V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{ha } r < a \\ 0, & \text{ha } r > a \end{cases}$
- potenciálon való szóródásnál!
- 7.18. Határozzuk meg gyors elektron alapállapotú hidrogénatomon való rugalmas szóródásának hatáskeresztmetszetét, Born-közelítésben!

8. Töbptestprobléma

- 8.1. Írjuk fel az N részecskéből álló rendszer Schrödinger-egyenletét! Mutassuk meg, hogy ha a rendszer zárt, akkor a tömegközéppont mozgása leválasztható a részecskék relatív mozgásáról!

- 8.2. N azonos részecskéből álló rendszer hullámfüggvényét egyrészecske-hullámfüggvények szorzatából építettük fel. Mutassuk meg, hogy egy külső erő hatását leíró operátor várható értéke egyrészecske-hullámfüggvényekkel számított várható értékek összegeként állítható elő!
- 8.3. Hozzuk egyszerűbb alakra az előző feladatban szereplő rendszerben a párkölcsönhatásokat leíró $\hat{\Omega} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq k=1}^N \hat{\Omega}(x_i x_k)$ operátor várható értékét!
- 8.4. Bizonyítsuk be, hogy ha egy kvantummechanikai rendszert pusztán Coulomb-kölcsönhatás tart össze, akkor

$$2\bar{E}_{\text{kin}} + \bar{E}_{\text{pot}} = 0. \quad (\text{Viriáltétel.})$$

- 8.5. Egy atom K héja két, $1s$ állapotú elektront tartalmaz, a mag töltése Ze , tömege végtelen nagyra tekinthető. Egyrészecske-hullámfüggvényként használjuk a $\left(\frac{Z'^3}{\pi a^3}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{Z'r}{a}\right)$ „árnyékolt” hullámfüggvényt! ($Z' < Z$, mert az egyik elektron a másik elektron számára részben leárnyékolja a mag töltését.) Z' -t variációs paraméternek tekintve, számítsuk ki az energia közelítő értékét!
- 8.6. Becsüljük meg, hogyan függ a nagy rendszámú elemek kötési energiája a rendszámtól! (Az elektronok egymással való kölcsönhatását hanyagoljuk el.)
- 8.7. Két, alapállapotú hidrogénatom egymástól nagy távolságban helyezkedik el, az atommagokat nyugvóknak tekinthetjük. Mutassuk meg, hogy a két atom közötti kölcsönhatás a perturbációszámítás első közelítésében eltűnik, a másodrendű közelítés pedig a van der Waals-erőre vezet!
- 8.8. Számítsuk ki a lítiumatom kötési energiáját alapállapotban! Variációs paraméterként a Z' effektív magtöltést használjuk, a kicserélődési kölcsönhatást hanyagoljuk el.